

РЕАЛИЗАЦИЯ ИНФОРМАЦИОННОЙ ТЕХНОЛОГИИ МОНИТОРИНГА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСИ В СЛИТКАХ КРЕМНИЯ

На основании информационной технологии мониторинга распределения примеси разрабатывается программный продукт, который реализует настройку математических моделей, входящих в состав системы виртуального мониторинга, непосредственно мониторинг условий в тепловом узле ростовой установки и позволяет выводить полученную информацию в виде таблиц и графиков.

1. Введение

Повышение качества монокристаллических слитков кремния требует более точного воспроизведения оптимальных условий выращивания. Для этого необходим непрерывный контроль распределения лигатуры в зоне кристаллизации и выращенной части слитка. Однако такой контроль возможен только косвенными методами, с привлечением специфических математических моделей, способных идентифицировать температурное поле расплава и слитка в реальном времени по результатам прямых измерений температуры в отдельных точках теплового узла, скорости вращения затравки и тигля и других параметров.

Целью данного исследования является разработка специализированного программного обеспечения для расчёта и мониторинга температурных полей в системе кристалл-расплав.

2. Постановка задачи

На основании информационной технологии мониторинга распределения примеси был создан программный продукт, который реализует настройку математических моделей, входящих в состав системы виртуального мониторинга, непосредственно мониторинг условий в тепловом узле ростовой установки и позволяет выводить полученную информацию в виде таблиц и графиков.

Программный комплекс предназначен для применения непосредственно в процессе выращивания монокристаллов, кроме того, он может быть использован при численных экспериментах по исследованию и оптимизации физических параметров теплового узла.

Отказ от использования готовых программных продуктов и создание собственного обусловлено рядом факторов – «тяжелые» программные пакеты, представленные на рынке, многофункциональны и ресурсоёмки, поскольку предназначены для решения широкого круга задач. Кроме того, в эти пакеты чрезвычайно трудно встраивать дополнительные процедуры и модули, необходимость в которых может возникнуть в процессе совершенствования системы мониторинга и системы управления процессом выращивания монокристаллов.

Программный комплекс позволяет задать:

- размеры и форму тигля и слитка;
- размеры, форму и положение экрана и нагревателя;
- температуропроводность кристалла и расплава и их начальные температуры;
- граничные условия первого, второго и третьего рода;
- ряд других параметров, таких как приведенные коэффициенты черноты слитка, экрана, тигля, коэффициент конвективного теплового потока во внешнюю среду и др.

Применяемая в расчете математическая модель является плоской и осесимметричной, т.е. рассматривает тепловой узел в радиальном разрезе, секущая плоскость которого проходит через ось симметрии узла. В модель включены: слиток; система тепловых экранов, включая нагреватель; расплав кремния и тигель. Тепловой экран считается активным и может составлять с нагревателем единое целое.

Важным элементом математической модели являются граничные условия, которые используются для сопоставления процесса моделирования определённым реальным условиям. Для повышения адекватности результатов расчетов в различных режимах и на различных стадиях выращивания применяются специальные нейронные сети.

Структура программного комплекса показана на рисунке.



Программный комплекс реализует следующие функции:

1. Инициализацию модели в соответствии с заданными параметрами.
2. Моделирование лучевого теплообмена.
3. Моделирование теплообмена за счёт теплопроводности и конвекции.
4. Определение предполагаемых формы и расположения фронта кристаллизации.
5. Предоставляет данные, полученные в результате моделирования в виде графиков и таблиц вертикального и горизонтального распределения температур, предполагаемых расположения и формы фронта кристаллизации.
6. Предоставляет возможность экспорта полученных данных в форматах, принятых в программах MS Excel и MathCAD.

Первая из задач решается методом конечных разностей (МКР), основанным на замене истинных значений производных, входящих в дифференциальное уравнение, приближёнными значениями в узлах сетки [1,2]. Расчетная схема построена с помощью метода переменных направлений [3]. Конечно-разностный подход является наиболее эффективным при решении квазистационарных задач. Простота записи конечно-разностных выражений и

отсутствие необходимости построения конечно-элементных сеток делают МКР весьма популярным среди многих пользователей. В данном случае применение МКР способствует ускорению расчетов и позволяет при небольших затратах вычислительных ресурсов сделать ряд «снимков» теплового поля в реальном времени технологического процесса.

Расчетная схема построена с помощью метода переменных направлений [4,5]. Он позволяет значительно сократить объем вычислений и получить вполне адекватные результаты при счете даже на сравнительно грубых сетках.

Процесс моделирования включает в себя итеративное исполнение всех этапов расчета. После каждой из таких итераций известны: текущее распределение лигатуры в теле монокристалла и предполагаемые размещение и форма фронта кристаллизации. Моделирование заканчивается после достижения требуемой точности, расчёт которой проводится анализом изменения распределения лигатуры в теле монокристалла на текущей итерации по сравнению с предыдущей, либо по достижении заданного числа итераций.

Для реализации пакета программ системы виртуального мониторинга была выбрана модульная структура. Она предусматривает наличие ряда элементов (модулей), которые составляют единый программный комплекс. Каждый из таких элементов решает определённую задачу или ряд родственных задач.

Основным преимуществом модульной структуры программного обеспечения по сравнению с монолитной структурой является возможность построения сложных систем за счёт распределения их на множество модулей, каждый из которых выполняет специфические функции. Кроме того, модульная архитектура упрощает командную разработку программных продуктов, поскольку предоставляет большее количество возможных вариантов распределения заданий между разработчиками. Однако наибольшим преимуществом модульной структуры является значительная расширяемость построенных на её основе программных продуктов, что становится возможным благодаря созданию новых модулей без необходимости доступа к программному коду уже существующих модулей.

Идеальным случаем использования модульной структуры программного обеспечения являются проекты, которые предусматривают некую начальную функциональность, однако в будущем будут расширяться за счёт решения новых задач и их интеграции с уже существующими. Данное преимущество модульной структуры особенно проявляется при доработке уже существующей системы другими разработчиками, которые могут не иметь полного представления о тонкостях внутреннего функционирования уже существующих модулей.

Таким образом, учитывая возможность дальнейшего расширения разрабатываемого программного обеспечения, модульная структура была выбрана как более перспективная. Особенно актуальным этот выбор становится с учётом того, что разрабатываемая система виртуального мониторинга распределения лигатуры является составной частью системы «Советчик мастера». Она разрабатывается другими разработчиками, которые, используя существующие модули, могут реализовать дополнительный функционал.

Разработанная подсистема «Виртуальный мониторинг» обеспечивает решение следующих основных задач:

1. Измерение температуры нагревателя с погрешностью $\pm 6^\circ\text{C}$.
2. Воссоздание температурного поля (абсолютных значений, $^\circ\text{C}$ и градиентов температуры по радиусу и по вертикальной оси, $^\circ\text{C}/\text{см}$) в подкристалльной области и в слитке и вывод результатов измерений и вычислений на монитор оператора-технолога.
3. Вывод на монитор предполагаемой формы фронта кристаллизации в графическом виде.
4. Формирование предпосылок для прогнозирования вероятности превышения плотности дислокаций в выращиваемом слитке с учетом следующих факторов:
 - уровень радиальных и осевых градиентов в зоне фронта кристаллизации и в слитке;
 - соотношение диаметров слитка и тигля;
 - стадия процесса выращивания;
 - текущий уровень расплава в тигле;
 - скорость вытягивания, скорости вращения слитка и тигля.
5. Периодическое уточнение параметров моделей и алгоритмов прогнозирования.

6. Ведение базы данных подсистемы и ее синхронизация с централизованной базой данных.

Подсистема реализована на промышленном компьютере и интегрирована в автоматизированную систему управления ростовой установкой.

Внедрение подсистемы виртуального мониторинга температурных полей позволило более подробно исследовать влияние тепловых условий в зоне кристаллизации на уровень термоупругих напряжений в слитках GaAs.

Для минимизации уровня напряжений и соответственно плотности дислокаций идеальна ситуация, в которой существует постоянный осевой градиент температуры, тогда как радиальный градиент температуры близок к нулю. В этом случае термоупругие напряжения будут минимальными. Исследования показали, что осевой градиент температуры в слитке можно сделать практически постоянным путем выбора оптимального по размерам и положению теплового экрана. Радиальные градиенты температуры, однако, чрезвычайно зависимы от изменений режима оттока тепла от слитка в зоне фронта кристаллизации и герметизатора и являются причиной избыточных термоупругих напряжений.

Для подтверждения эффективности разработанных методов, моделей и информационных технологий мониторинга температурных полей в решении проблемы качества монокристаллов GaAs были проведены экспериментальные сравнительные исследования остаточных напряжений и плотности дислокаций в слитках кремния, выращиваемых на стандартной установке и модернизированной установке, в систему автоматизированного управления которой встроена подсистема виртуального мониторинга.

Остаточные напряжения исследовались по длине выращенных слитков использовалась автоматизированная установка измерения внутренних напряжений в пластинах GaAs «Полярон-2», реализующая метод SIRP и экспрессную методику определения структурного совершенства в пластинах GaAs.

Исследование остаточных напряжений проводилось на специально подготовленных шлифовано-травленных пластинах толщиной 450 ± 15 мкм, вырезанных из верхней, центральной и нижней части слитка.

При исследовании плотности дислокаций применялся автоматизированный телевизионный метод подсчета дислокаций. Суть этого метода состоит в подсчете числа ямок травления в поле зрения металлографического микроскопа, подключенного к телевизионной камере, изображение с которой вводится в компьютер и обрабатывается специальной программой.

Результаты измерений показали, что значения остаточных напряжений в слитках, выращенных на усовершенствованной ростовой установке «Арсенид-1М», снизились по сравнению со слитками, выращенными на установке «Арсенид-1», в верхней части слитка на 24 %, в средней части – на 32 % и в нижней – на 26 %. По мнению специалистов предприятия это стало возможным благодаря тому, что мастер-технолог использует результаты мониторинга для своевременного регулирования распределения лигатуры на разных стадиях выращивания.

3. Выводы

1. Из экспериментальных данных исследования плотности дислокаций по длине слитков, выращенных на ростовой установке «Арсенид 1М», можно сделать вывод о том, что применение системы виртуального мониторинга приводит к уменьшению остаточного напряжения и, как следствие, к уменьшению плотности дислокаций в слитке.

2. Разработано программное обеспечение для решения задач виртуального мониторинга распределения лигатуры и определения формы и расположения фронта кристаллизации.

3. Разработанный программный комплекс включает программные модули, реализующие задачи распределения лигатуры расплава, слитка и моделирование процесса кристаллизации, которые связаны между собой через главный модуль «Координация», обеспечивающий согласованную работу всех частей системы. Пользователь имеет возможность задавать геометрические и физические параметры элементов теплового узла ростовой установки, вводить фиксированные и начальные значения параметров режима выращивания, при необходимости проводить дообучение системы.

Список литературы: **1.** *Каханер Д.* Численные методы и программное обеспечение : Уч. пособие / Д.Каханер, К. Моулер, С. Нэш. М.: Мир, 1998. 435 с. **2.** *Джордж А.* Численное решение больших разреженных систем уравнений : Уч. пособие / А. Джордж, Дж. Лю. М. : Мир, 1984. 343 с. **3.** *Тихонов А.Н.* Уравнения математической физики : Уч. пособие / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. М. : Наука, 1977. 735 с. **4.** *Формалев В.Ф.* Метод переменных направлений с экстраполяцией по времени для параболических задач со смешанными производными / В. Ф. Формалев // Вычислительные технологии. 1996. Том 1. № 2. С. 99-103. **5.** *Тихонов А. Н.* Уравнения математической физики : Уч. пособие / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. М.: Наука, 1977. 735 с.

Поступила в редколлегию 12.02.2016

Оксанич Ирина Григорьевна, канд.т техн. наук, профессор кафедры информационно-управляющих систем КрНУ им. М. Остроградского. Научные интересы: информационные технологии Адрес: Украина, 39600, Кременчуг, ул. Першотравнева, 20, тел.: (05366) 30157. Email: kafius@kdu.edu.ua

Притчин Алексей Сергеевич, аспирант кафедры компьютерных и информационных систем КрНУ им. М. Остроградского. Научные интересы: информационные технологии Адрес: Украина, 39600, Кременчуг, ул. Першотравнева, тел.: (05366) 30157. Email: alpritchin@ukr.net